

学校编码: 10384

分类号_____密级_____

学号: 19020110153990

UDC_____

博 士 学 位 论 文

随机平面六角格与若干统计物理模型

Several statistical physics models on random planar hexagonal lattice

任 海 珍

指导教师姓名: 张 福 基 教授

专 业 名 称: 应 用 数 学

论文提交日期: 2014 年 月

论文答辩时间: 2014 年 月

学位授予日期: 2014 年 月

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2014 年 月

Doctoral Dissertation

**Several statistical physics models on random
planar hexagonal lattice**

By

Haizhen Ren

Supervisor: Professor Fuji Zhang

Speciality: Applied Mathematics

Institution: School of Mathematical Sciences

Xiamen University

Xiamen, P.R. China

April, 2014

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（ ）课题（组）的研究成果，获得（ ）课题（组）经费或实验室的资助，在（ ）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

☐ 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

☐ 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

随机平面六角格与若干统计物理模型

摘 要

从 20 世纪 40 年代起, 在统计物理大量粒子系统的研究中就出现了组合学方法的踪影, 2006 年 Fields 奖获得者 Okounkov 的获奖成果之一就与这方面的工作密切相关. 石墨烯(grapheme)即为“单层石墨片”, 是构成石墨的基本结构单元. 石墨烯是真正意义上的二维晶体结构, 它具有可与碳纳米管相媲美或更优异的特性, “二维空间材料石墨烯方面的开创性实验”使得 Andre Geim 和 Konstantin Novoselov 成为 2010 年诺贝尔物理学奖的获得者. 石墨烯的数学模型为六角系统(源于苯类碳氢化合物的分子图), 它是不具有割点的有限连通平面图, 其每一个内面的边界是边长为 1 的正六边形. 六角系统是理论化学和统计物理的传统研究对象, 已积累了大量的研究成果. 本论文提出并研究了一种随机六角系统的模型—随机六角重链, 它的增长过程模拟单壁碳纳米管的生长过程. 尽管一般的随机正则图已有很好的研究成果, 但随机正则图的样本空间不是由现实世界中的化合物分子图构成, 而我们的随机模型的样本空间是由现实世界中的化合物分子图构成. 据我们所知, 这是第一个样本存在于现实世界的蜂巢晶格随机模型.

统计物理以大量粒子的集合为研究对象, 为了描述其中的相变现象, 物理学家定义了图(以各种二维网格为特例)上的自旋模型(Ising 模型), 给出了系统的配分函数. q 状态的 Potts 模型是 Ising 模型的推广, Potts 模型的配分函数等价于 Tutte 多项式. Dimer 问题、Monomer-dimer (MD)问题源于双原子分子在固体表面的吸附模型, 这些模型配分函数的计算均为 $\#P$ - 困难问题. 本文研究了随机六角重链上的 dimer 模型、monomer-dimer 模型、 q 状态的 Potts 模型. 主要贡献如下:

(1) 研究了随机六角重链的 dimer 问题, 给出了 dimer 的计数公式、dimer 问题的 annealed 熵与 quenched 熵. 在区分不同方向的三个 dimer 类型的条件下得到了配分函数的计算公式, 并讨论了它的渐近性;

(2) 利用代数方法和组合技巧建立了一般二部图的 monomer-dimer 配分函数的计算表达式与 0-1 矩阵积和式的对应关系, 改进了 Yan Huo 和 Fengshan Bai 的方法;

(3) 研究了随机六角重链的 monomer-dimer 问题, 给出了 monomer-dimer 配分函数及 monomer-dimer 常数、annealed MD 熵与 quenched MD 熵的计算公式, 讨论了它们的渐近性;

(4) 研究了随机六角重链的 q 状态的 Potts 模型配分函数的计算问题, 给出了具体的递推公式, 由此可得到生成树、无圈定向等的计数公式及渐近性.

关键词: 随机六角重链; 矩阵积和式; Dimer 模型; Monomer-dimer 模型; q 状态的 Potts 模型; 转移矩阵

Several statistical physics models on random planar hexagonal lattice

ABSTRACT

Since the 1940's, combinatorial methods has appeared in the study of systems of large number of particles in statistical physics. One of the achievements of 2006 Fields medal winner Okounkov is closely related to this topic. Graphene, i.e, monolayer graphite piece, constitute the basic structure unit of graphite. Graphene is a two-dimensional crystal structure in the real world which is an allotrope of carbon nanotube and fullerene with equivalent or superior characteristics such as strong, light, nearly transparent and an excellent conductor of heat and electricity. "Two-dimensional space material graphene in pioneering experiment" that caused Andre Geim and Konstantin Novoselov to be the winner of Nobel prize for physics in 2010.

The mathematical model of graphene is the hexagonal system, which is a finite 2-connected plane graph whose every interior face is bounded by a regular hexagon of unit length 1. Hexagonal system is a traditional topic of chemical and statistical physics, which has accumulated a lot of research results. This thesis proposes and studies a kind of random model of hexagonal system - random hexagonal multiple chain whose growth process is a simulation of the growth of single-walled carbon nanotubes. Although there are several good results on general stochastic regular graphs, the sample space of random regular graphs is not formed by the compound molecular graphs in the real world, but the sample space of our random model is made up of compound molecular graphs in the real world. To the best of our knowledge, this is the first random model of honeycomb lattices whose samples exist in the real world.

The research object of statistical physics is the collection of a large number of particles. In order to describe the phase transition phenomena, physicists defined the spin model(Ising model) on a variety of graphs (two-dimensional grid) and the partition function of the system was introduced. The q -state Potts model is a generalization of

the Ising model. The partition function of Potts model is equivalent to the Tutte polynomial in combinatorics. monomer- dimer (or dimer) problem was introduced in order to describe the absorption of diatomic molecules on crystal surface. The counting and calculation of the partition function of these models are *sharpP*- hard problem. This thesis studies dimer model, the monomer-dimer model, q-state Potts model on the random hexagon multiple chain respectively. The main contributions are as follows:

(1) The problem of dimer on the random hexagon multiple chain is considered, and the calculating formulas of dimer constants, the annealed entropy, the quenched entropy, and the partition function on the three types of dimers in different orientations distinguished are obtained respectively. Their asymptotic limiting functions are also determined.

(2) Algebraic methods and combinatorial techniques are used to establish the corresponding relationship between the computational expression of the monomer-dimer partition function of general bipartite graph and $(0,1)$ - matrix permanent, which improve the results of Yan Huo and Fengshan Bai.

(3) The problem of monomer-dimer on the random hexagon multiple chain is considered, and the calculating formulas of m-d partition functions m-d constants, the annealed m-d entropy and quenched m-d entropy are obtained respectively. Their asymptotic limiting functions are determined.

(4) The computation problem of partition functions of q-state Potts model on the random hexagon multiple chain is considered, and the specific recurrence formulas are obtained, from which we can get the calculating formulas of the spanning trees and the acyclic orientations etc., their asymptotic limiting functions are also determined.

Key Words: Random hexagonal multiple chain; Matrix permanent; Dimer model; Monomer-dimer model; q-state Potts model; Transfer matrix

目 录

摘 要	I
ABSTRACT	III
第一章 绪论	1
§1.1 基本概念和记号	2
§1.2 研究背景及进展	9
§1.3 本文主要工作概述	13
第二章 随机六角重链的dimer问题	19
§2.1 Dimer计数与转移矩阵	19
§2.2 Dimer问题的annealed熵与quenched熵	24
§2.3 不同方向的三个dimer类型的配分函数的计算	28
§2.4 注记	31
第三章 二部图的monomer-dimer配分函数与0-1矩阵积和式	32
§3.1 矩阵积和式	32
§3.2 二部图的MD配分函数与0-1矩阵积和式的对应	33
第四章 随机六角重链的monomer-dimer问题	36
§4.1 Monomer-dimer计数与转移矩阵	36
§4.2 Annealed MD熵和quenched MD熵	41
§4.3 应用	44
§4.4 注记	50

第五章 随机六角重链的 q 状态的Potts模型	52
§5.1 q 状态的Potts模型配分函数的计算	52
§5.2 应用	58
§5.3 后记	67
附录	68
参考文献	75
攻读博士学位期间的研究成果	82
致 谢	83

CONTENTS

Abstract (in Chinese)	I
Abstract (in English)	III
Chapter 1 Introduction	1
§1.1 Terminology and notation	2
§1.2 Backgrounds and research developments	9
§1.3 Main results	13
Chapter 2 Dimer problem on random hexagon multiple chain	19
§2.1 Computing dimers and transfer matrices	19
§2.2 The annealed entropy and the quenched entropy	24
§2.3 The partition function on three dimer types in different orientations	28
§2.4 Remarks	31
Chapter 3 MD partition function of bipartite graph and $(0, 1)$ matrix permanent	32
§3.1 Matrix permanent	32
§3.2 Relationship of MD partition function and matrix permanent	33
Chapter 4 MD problem on random hexagon multiple chain	36
§4.1 Monomer-dimer computing and transfer matrices	36
§4.2 The annealed MD entropy and the quenched MD entropy	41
§4.3 Applications	44

§4.4	Remarks	50
Chapter 5 q-state Potts model of random hexagon multiple chain		52
§5.1	Calculation of the partition function of q-state Potts model	52
§5.2	Applications	58
§5.2	Final remarks	67
Appendix		68
Bibliography		75
Academic achievements		82
Acknowledgements		83

符号表

X	集合
$ X $	集合 X 包含的元素个数
$X \subseteq Y$	集合 Y 的子集 X
$X \subset Y$	集合 Y 的真子集 X
$X \cup Y$	集合 X 与 Y 的并集
$X \cap Y$	集合 X 与 Y 的交集
$X \setminus Y$	集合 X 与 Y 的差
$\lceil x \rceil$	不小于实数 x 的最小整数
$\lfloor x \rfloor$	不大于实数 x 的最大整数
per	积和式
Det	行列式
A^T	矩阵 A 的转置
G	图
$V(G)$	图 G 的顶点集
$E(G)$	图 G 的边集
p	概率
\mathbb{E}	期望
$d_G(v)$	图 G 中顶点 v 的度
K_n	n 个顶点的完全图
$K_{m,n}$	完全二部图(其中两部顶点数分别为 m, n)
$H \subseteq G$	图 G 的子图 H
$G[V']$	图 G 的由顶点集 $V' \subseteq V(G)$ 导出的子图
$G - V'$	图 G 的由顶点集 $V(G) \setminus V'$ 导出的子图
$G[E']$	图 G 的由边集 $E' \subseteq E(G)$ 导出的子图
$G - E'$	图 G 的删去 E' 中的边后得到的子图

$G \cong H$	图 G 同构于图 H
P_n	包含 n 个顶点的路
C_n	包含 n 个顶点的圈

厦门大学博硕士论文摘要库

第一章 绪论

统计物理是从物质微观结构和相互作用的认识出发, 说明或预言大量粒子组成的宏观物体的物理性质. “大量”的程度可以由阿伏伽德罗常数 $N_A = 6.022045 \times 10^{23} \text{mol}^{-1}$ 来衡量, 这里每一摩尔物质, 等同 18 克水或 32 克氧气所含有的分子数目. 从 20 世纪 40 年代起, 在统计物理大量粒子系统的研究中就出现了组合学方法的踪影, 2006 年 Fields 奖获得者 Okounkov 的获奖成果之一就与这方面的工作密切相关.

六角系统(源于苯类碳氢化合物的分子图)是不具有割点的有限连通平面图, 其每一个内面的边界是边长为1的正六边形. 石墨烯(graphene)即为“单层石墨片”, 是构成石墨的基本结构单元, 其骨架图为六边形组成的蜂窝状结构. 从结构上来看, 石墨烯是真正意义上的二维晶体结构; 从性能上来看, 石墨烯具有可与碳纳米管相媲美或更优异的特性, 例如高电导率和热导率、高载流子迁移率、自由的电子移动空间、高强度和刚度等. “二维空间材料石墨烯方面的开创性实验”使得英国曼彻斯特大学物理和天文学院的 Andre Geim 和 Konstantin Novoselov 成为 2010 年诺贝尔物理学奖的获得者.

石墨烯是近年来物理学与材料科学的一个研究热点, 本文在研究碳纳米管生成过程的基础上提出了石墨稀生成的一个随机模型-随机六角重链: 即在前一个直六角线链(一种无分叉的渺位苯类碳氢化合物的图论表示)的底部以两种可能方式分别粘接此直六角线链的拷贝, 随机生成的重链服从伯努利分布, 它描述了一个零阶马尔可夫过程, 这是一个具有非周期性边界条件的晶格系统. 据我们所知, 这是第一个样品存在于现实世界的蜂巢晶格随机模型.

统计物理以大量粒子的集合为研究对象, 为了描述其中的相变现象, 物理学家定义了图(以各种二维网格为特例)上的自旋模型(Ising 模型), 给出了系统的配分函数. q 状态的 Potts 模型是 Ising 模型的推广, Potts 模型的配分函数等价于 Tutte 多项式. Dimer 问题、monomer-dimer 问题源于模拟双原子分子在晶格表面的吸附模型. Dimer 模型、monomer-dimer 模型和 q 状态的 Potts 模型均

为经典的统计力学模型，其基本问题分别是 dimer 计数、monomer-dimer 计数和 q 状态的 Potts 模型配分函数的计算，这些均为 $\#P$ -完全问题。

本章将给出一些基本概念和记号，并介绍格子系统求解 dimer 问题、monomer-dimer 问题以及 q 状态的 Potts 模型计算问题的研究背景及研究进展，最后列举本文的主要研究结果。

§ 1.1 基本概念和记号

设图 $G = (V(G), E(G))$ 的顶点集和边集分别为 $V(G)$ 和 $E(G)$. 若图 G 的顶点 u 和 v 由边 e 相连，则称 u 和 v 是 e 的端点(endpoint)，记为 $e = uv$ ； e 与 u 、 v 相互关联； u 和 v 是相邻的. 图 G 的顶点 v 的度(degree)是指 G 中与 v 关联的边的数目，记为 $d_G(v)$. 容易看出

$$\sum_{v \in V(G)} d_G(v) = 2|E(G)|.$$

若对所有 $v \in V(G)$ ，有 $d_G(v) = k$ ，则称 G 是 k -正则的(k -regular).

每一对不同的顶点都有一条边相连的简单图称为完全图(complete graph). 在同构的意义下， n 个顶点的完全图只有一个，记为 K_n . 若一个图的顶点集可以分解为两个(非空)子集 X 和 Y ，使得每条边都有一个端点在 X 中，另一个端点在 Y 中，则称这样的图为二部图(bipartite graph)，而划分 (X, Y) 为图的一个顶点二分类(bipartition). 完全二部图是具有二分类 (X, Y) 的简单二部图，其中 X 的每个顶点都与 Y 的每个顶点相连；若 $|X| = m$ ， $|Y| = n$ ，则这样的图记为 $K_{m,n}$.

若图 H 的顶点均是 G 的顶点，且 H 的边是 G 的边，则称 H 是 G 的子图(subgraph)；特别地，若 $V(H) = V(G)$ ，则称 H 是 G 的生成子图(spanning subgraph). 设 V' 是 $V(G)$ 的一个非空子集，以 V' 为顶点集，两端点均在 V' 中的边的全体为边集所组成的 G 的子图，称为 G 的由 V' 导出的子图(subgraph induced by V')，记为 $G[V']$. 从 G 中删除 V' 中的顶点以及与这些顶点关联的边所得的子图，即 $G[V \setminus V']$ ，记为 $G - V'$. 相应地，设 E' 是 $E(G)$ 的一个非空子集，以 E' 为边集， E' 中边的端点的全体为顶点集所组成的 G 的子图，称为 G

Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”. Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库